强化学习 tutorial

甄景贤 (King-Yin Yan)
General.Intelligence@Gmail.com

March 12, 2019

1 什么是强化学习?

Reinforcement learning 是机器学习里面的一个分支,特别善於控制一只能够在某个环境下 自主行动 的个体 (autonomous agent),透过和环境之间的互动,例如 sensory perception 和 rewards,而不断改进它的 行为。

听到强化学习,你脑里应该浮现一只曱甴那样的小昆虫,那就是 autonomous agent 的形象:

$$\widehat{\mathcal{M}}$$
(1)

对「环境」(environment) 这概念,你应该想到像以下这经典游戏的迷宫:



包括有追捕你的怪物、和吃了会加分的食物(这些代表负值和正值的 rewards)。当然,实际应用的「环境」和「奖励」可以是抽象的,这游戏是一个很具体的例子。

1.1 输入 / 输出

记住, reinforcement learning 的输入是:

- 状态 (States) = 环境,例如迷宫的每一格是一个 state
- 动作 (Actions) = 在每个状态下,有什么行动是容许的
- 奖励 (Rewards) = 进入每个状态时,能带来正面或负面的价值 (utility)

而输出就是:

- 方案 (Policy) = 在每个状态下, 你会选择哪个行动?

於是这 4 个元素的 tuple (S A R P) 就构成了一个强化学习的系统。在抽象代数中我们常常用这 tuple 的方法 去定义系统或结构。

再详细一点的例子就是:

- states S = 迷宫中每一格的位置,可以用一对座标表示,例如 (1,3)
- actions A = 在迷宫中每一格,你可以行走的方向,例如: {上,下,左,右}
- rewards R = 当前的状态 (current state) 之下,迷宫中的那格可能有食物 (+1) 、也可能有怪兽 (-100)
- policy P = -个由 状态 \rightarrow 行动 的 函数,意即:这函数对给定的每一个状态,都会给出一个行动。

(S,A,R) 是使用者设定的,P 是算法自动计算出来的。

1.2 人与虫之间

第一个想到的问题是:为什么不用这个方法打造人工智能?但现时的强化学习算法,只对比较细小和简单的环境适用,对於大的复杂的世界,例如象棋的 10^{xxx} 状态空间,仍是 intractable 的。

关键就是,高等智慧生物会在脑中建立世界的模型 (world model) 或知识 (knowledge),而强化学习只是关心简单的「状态一行动」配对。

强化学习的领导研究者 Richard Sutton 认为,只有这种学习法才考虑到 自主个体、环境、奖励 等因素,所以它是人工智能中最 top-level 的 architecture,而其他人工智能的子系统,例如 logic 或 pattern recognition,都应该在它的控制之下,我觉得颇合理。

(3)

所以要制造 strong AI, 一个可能的方案就是结合强化学习和某种处理复杂 world model 的能力:

「你们已经由虫进化成人,但在你们之内大部份仍是虫。」

— 尼采, Thus spoke Zarathustra

[如果人类不相信他们有一天会变成神,他们就肯定会变成虫。]

— Henry Miller

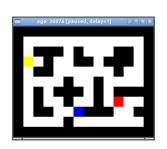
1.3 程式

学 AI 最紧要有 program,不然就会很枯燥。这是我在网上找到的一个特别简单的 demo,作者是 Travis DeWolf:

Reinforcement learning demo

只要 Python 便可运行,但你可能要 install PyGame。

猫、老鼠、芝士:



(5)

猫的行动是简单地朝着老鼠追(没有智能),老鼠的行动是学习出来的。

注意,在 main program 和 cellular.py 这两部分,纯粹是定义了迷宫世界如何运作,基本上是一个 game,里面完全没有智能,你可以用 {上、下、左、右} 控制各 agent 的活动,如此而已。

强化学习的程式在 glearn.py, 很短, 而真正学习的程式基本上只有一句, 就是:

单是这一句程式,就能令老鼠学到避开猫、吃芝士。以下再解释....

1.4 強化學習的原理

《AI — a modern approach》这本书第 21 章有很好的简介。《AIMA》自然是经典,很多人说他们是读这本书而爱上 AI 的。这本书好处是,用文字很耐性地解释所有概念和原理,思路很清晰,使读者不致有杂乱无章的感觉。例如 21 章 首先讲 passive reinforcement learning,意思是当 policy 是固定时,纯粹计算一下 agent 期望的价值(utility,即 rewards 的总和)会是多少。有了这基础后再比较不同 policies 的好坏。这种思路在数学中很常见:首先考虑简单到连白痴也可以解决的 case,然后逐步引入更多的复杂性。例如数学归纳法,由N=1 的 case 推到 $N\to\infty$ 。

为免重复,我只解释到明白 Q learning 的最少知识。

1.5 Utility (价值,或效)

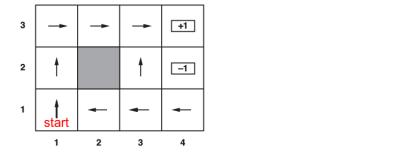
U 是一连串行动的 rewards 的总和。例如说,行一步棋的效用,不单是那步棋当前的利益,还包括走那步棋之后带来的后果。例如,当下贪吃一只卒,但 10 步后可能被将死。又或者,眼前有美味的食物,但有些人选择不吃,因为怕吃了会变肥。

一个 state 的效用 U 就是:假设方案固定,考虑到未来所有可能的 transitions,从这个 state 开始的平均期望的 total reward 是多少:

$$U(S_0) = \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R(S_t)\right]$$

其中 $\mathbb{E}[\]$ 代表期望值, γ 是 discount factor,例如 0.9 或什么。

实例:考虑这简单的迷宫:



(6)

那些箭咀表示的是众多可能方案中的其中一个。

根据这个方案,由(1,1)开始的运行可能是这个结果:

下面橙色的值是每个 state 的 reward。在这例子中,每个不是终点的格,也会扣 0.04 分。

但从同一起点,同一方案,也可以出现不同结果,例如在 (1,3) 企图向右爬,但实际结果是向下跌一格;这些 state transitions 是由外在世界的机率决定的。(例如某人读了大学文凭,但遇上经济不景,他的薪水未必能达到行动的预期效果。)

同一方案的运行结果可以是:

或者:

$$(1,1)$$
 \longrightarrow $(2,1)$ \longrightarrow $(3,1)$ \longrightarrow $(3,2)$ \longrightarrow $(4,2)$ \longrightarrow -0.04 \longrightarrow -0.0

1.6 Bellman condition

这是 dynamic programming (动态规划)的中心思想,又叫 Bellman optimality condition。

在人工智能里我们叫 reinforcement learning,但在控制论的术语里叫 dynamic programming,两者其实是一样的。Richard Bellman 在 1953 年提出这个方程,当时他在 RAND 公司工作,处理的是运筹学的问题。他也首先使用了"curse of dimensionality" 这个术语,形容动态规划的主要障碍。

考虑的问题是:要做一连串的 sequential decisions。

Bellman equation 说的是:「如果从最佳选择的路径的末端截除一小部分,馀下的路径仍然是最佳路径。」

换句话说,如果一系列的选择 A B C D E.... 是最优的,那么这系列除去开始的 A,那 B C D E.... 系列应用在后继的状态上也是最优的。

(例如, 你从香港乘车到北京, 选择了最便官的路线, 此路线经过 10 个车站, 第二站是深圳:

但如果除去出发点香港站,那么由第二站深圳到最后的北京站:

这路线仍然是馀下 9 个站之间最便宜的。)

用数学表示:

$$U^*(S) = \max_{a} \{ R(a) + U^*(S') \}$$

ie, $U^*($ 全路径 $) = \max_a \{ R($ 在当前状态下选取 a $) + U^*($ 馀下路径 $) \}$

*表示最优 (optimal)。这条看似简单的式子是动态规划的全部内容;它的意义是:我们想获得最佳效益的路径,所以将路径切短一些,於是问题化解成一个较小的问题;换句话说它是一个 recursive relation。

1.7 Delta rule

这只是一个简单的 trick, 在机器学习中经常出现。假设我们有一个理想, 我们要逐步调教当前的状态, 令它慢慢趋近这个理想。方法是:

当前状态 := 当前状态 + α (理想 – 当前状态)

其中 α 叫「学习速度 (learning rate)」。"Delta" (Δ) 指的是理想和现状之间的差异。

很明显,只要反覆执行上式,状态就会逐渐逼近理想值。

(Delta rule 的微分形式就是我们熟悉的「梯度下降」: $x += \eta \cdot \frac{dy}{dx}$)

1.8 Temporal difference (TD) learning

将 delta rule 应用到 Bellman condition 上,去寻找最优路径,这就是 temporal difference learning。

我们还是从简单情况开始: 假设方案固定,目标是学习每个 state 的 utility。

理想的 U(S) 值,是要从 state S 开始,试验所有可能的 transitions,再计算这些路径的 total rewards 的平均值。

但实际上, agent 只能够每次体验一个行动之后的 state transition。

所以要应用 Bellman condition: 一个 state S 的 U 值,是它自身的 reward,加上所有可能的后继 states 的 U 值,取其机率平均,再乘以 discount factor γ :

$$U(S) = R(S) + \gamma \sum_{S'} P(S \to S') \ U(S')$$

其中 P 是 transition 的机率,S' 是后继 state, \sum 是对所有后继 states 求和。换句话说,这是理想的 U(S) 和 U(S) 的后继)之间的关系,是一个 recursive relation。

例如,假设 agent 现时对 state (1,3) 和 state (2,3) 的估值,分别为 0.84 和 0.92。又假设 agent 察觉到,根据现有方案,在 (1,3) 时总是会发生跳到 (2,3) 这个 transition。那么这两个 states 的 U 值,应该符合这条约束:

$$U(1,3) = -0.04 + U(2,3)$$

换句话说,这是两个 states 之间, U 值的 local (局部的) 约束。

TD learning 的思想是:假设其他 U(S') 的值正确,利用 Bellman optimality 来调整当下 state 的 U(S)。当尝试的次数多了,所有 U 值都会趋向理想。Agent 只需要用这条 update rule:

$$U(S) += \alpha[R(S) + \gamma U(S') - U(S)]$$

 α 是 learning rate,它决定学习的速度(但它不能太大,避免 overshooting)。后面那东西是 U(S) 和 U(S) 的估值 (estimation) 之间的差别。对於理想的 U(S) 和 U(S'),那差别会是 0。而在每个 time step,我们只是用 α 部分地 调整这个差别。

最后一提,在上面理想约束的公式里,有对於机率 P 的求和,但在 update formula 中 P 不见了。那是因为 agent 在环境中的行动,暗含了对於 state transition 机率的 sampling (随机地取样本)。换句话说,那机率求和是由 agent 本身体现的。

P 是 state transitions 的机率,换句话是关於世界的一个 model。TD learning 不需要学习 P,所以叫 model-free learning。但正如开篇时说过,model-free 并不一定是好事,人的智慧就是基於我们对外在世界有一些很好的 models。

1.9 Q value

Q 值只是 U 值的一个变种; U 是对每个 state 而言的,Q 把 U 值分拆成每个 state 中的每个 action 的份量。换句话说,Q 就是在 state S 做 action A 的 utility。

Q 和 U 之间的关系是:

$$U(S) = \max_{A} Q(S, A)$$

Q 的好处是什么? 下面将会介绍 active learning,而 Q value 配合 TD learning,可以在 active learning 中也消除 P,达到 model-free 的效果。

上面的 update rule 只要用这个关系改写就行:

$$Q(S, A) += \alpha [R(S) + \gamma \max_{A'} Q(S', A') - Q(S, A)]$$

1.10 Active learning

在 passive learning 中,方案不变,我们已经能够计算每个 state S 的效用 U(S),或者每个 state S 之下行动 A 的效用 Q(S,A)。

如果方案是可以改变的,我们只需计算不同方案的 Q 值,然后在每个 state S 选取相应於最大 Q 值的行动 A,那就是最佳方案,不是吗?

实际上执行的结果,却发现这些 agent 的方案很差!原因是,学习过程中的 Q 值是 estimate,不是理想的 Q 值,而如果根据这样的 Q 行动,agent 变得很短视,不会找到 optimal policy。(例如,某人经常吃同一间餐馆,但循另一路径走,可以发现更好的餐馆。)

Agent 需要尝试一些未知的状态 / 行动,才会学到 optimal policy; 这就是所谓的 exploration vs exploitation (好奇心 vs 短暂贪婪) 之间的平衡。

方法是,人工地将未知状态的价值增加一点:

$$U(S) = R(S) + \gamma \max_{A} \mathcal{F}\left[\sum_{S'} P(S \to S') U(S'), \ N(S, A) \ \right]$$

其中 N(S,A) 是状态 S 和行动 A 这对组合出现过(被经历过)的次数, \mathcal{F} 是 exploration 函数,它平时回覆正常的 U 的估计值,但当 N 很小时(亦即我们对 S,A 的经验少),它会回覆一个比较大的估值,那代表「好奇心」的效用。